

Квантово-химическое исследование оптической активности аскорбатов

Короткова Мария Анатольевна

Волгоградский государственный университет

Куценко Светлана Анатольевна, к.ф.-м.н.

MariyaKorotkovaSTUDENT2014@yandex.ru

Оптическая активность (поворот плоскости поляризации излучения в веществе) веществ очень чувствительна к изменениям пространственной структуры молекул и к межмолекулярному взаимодействию. Это явление может быть использовано для бесконтактного исследования веществ. Поляризуемость атомов, молекул и ионов определяет степень межмолекулярного взаимодействия и его влияние на оптическую активность среды. Ранее нами экспериментально были исследованы оптическая активность и электронные спектры растворов аскорбиновой кислоты и их изменение в процессе химических реакций [1], [2]. А в работе [3] определены углы поворота плоскости поляризации только излучения D-линии натрия ($\lambda=589$ нм) в водных растворах аскорбиновой кислоты. В настоящем исследовании проведено численное моделирование оптической активности аскорбатов методом конфигурационного взаимодействия CIS.

Для нахождения угла поворота плоскости поляризации использована квантово-химическая модель оптической активности [4]. В соответствие с этой моделью угол поворота плоскости поляризации определяется выражением:

$$\varphi = \frac{240}{hc^2} \cdot \frac{IN}{\epsilon_0} \cdot \frac{n^2 + 2}{3} \cdot \sum_k \frac{\lambda_{ki}^2 R_{ik}}{\lambda^2 - \lambda_{ki}^2} \quad (1)$$

где ℓ -толщина слоя, N-число молекул в единице объёма, c-скорость света в воздухе, h-постоянная Планка, ϵ_0 -электрическая постоянная, n-показатель преломления, λ_{ki} и R_{ik} – длина волны и вращательная сила перехода $i \rightarrow k$ соответственно.

Основными параметрами, влияющими на характеристики оптического вращения, являются вращательные силы и длины волн электронных переходов. Для нахождения этих параметров использован пакет программ Gaussian 09W. Предварительно структуры молекул исследуемых веществ были оптимизированы. Оптимизация геометрических параметров проводилась несколькими методами. Для дальнейших расчетов был выбран метод конфигурационного взаимодействия CIS с базисом 3-21g, исходя из того, что результаты электронных спектров, полученных этим методом, лучше всего совпадали с экспериментальными данными представленными в [2], [5]. Также были рассчитаны структурные параметры аскорбатов в водных растворах. Для расчета электронных спектров растворов использована модель поляризационного континуума (PCM) Томаси. Выбранным методом получены значения длин волн и вращательных сил электронных переходов в исследуемой молекуле.

Длины волн электронных переходов и соответствующие им значения вращательных сил R_{ik} были использованы для расчета угла поворота плоскости поляризации по формуле (1). Рассчитанные и экспериментальные зависимости углов поворота плоскости поляризации излучения в видимой области спектра от длины волны и концентрации растворов приведены на рис.1,2.

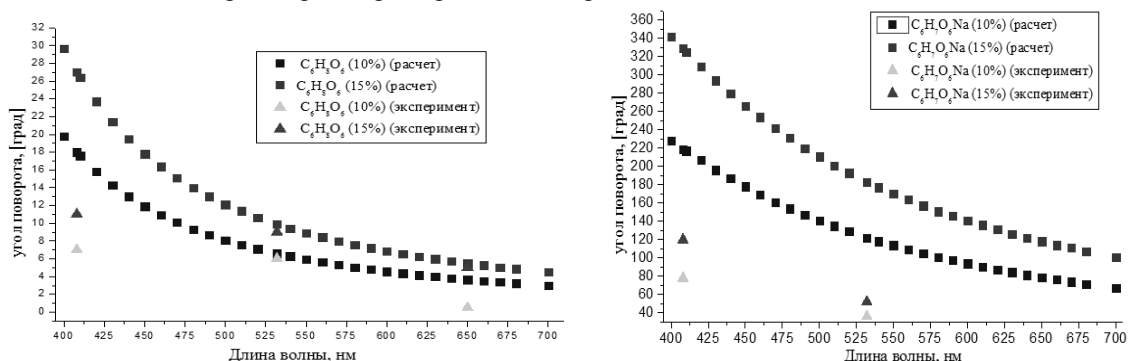


рис.1. Зависимости углов поворота плоскости поляризации от длины волны для 10 и 15% водных растворов аскорбатов.

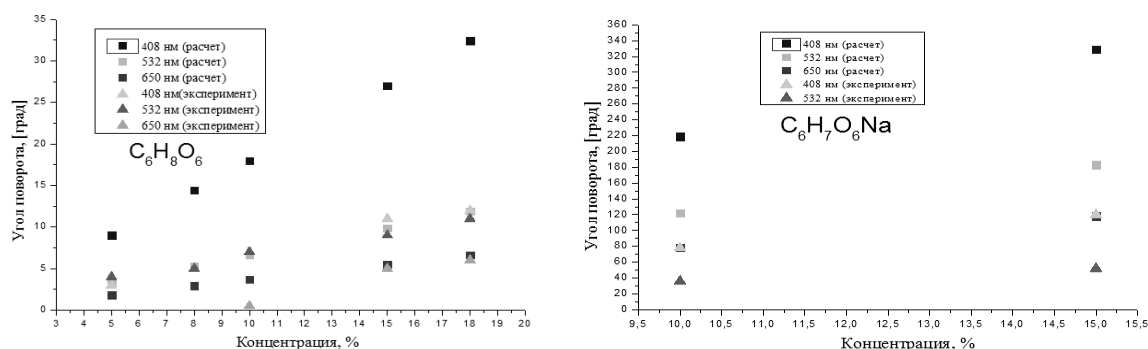


рис.2. Зависимости углов поворота плоскости поляризации от концентрации растворов аскорбатов для излучения с длинами волн $\lambda=408$ нм, 532 нм и 650 нм.

Видно, что с ростом концентрации растворов аскорбатов угол поворота плоскости поляризации возрастает, а с ростом длины волны лазерного излучения - убывает.

Из полученных зависимостей видно, что оптическая активность растворов аскорбината натрия существенно выше, чем для водных растворов аскорбиновой кислоты. Таким образом, расчетные зависимости качественно согласуются с экспериментальными. Полученные результаты могут быть использованы для количественного определения содержания аскорбиновой кислоты в лекарственных препаратах поляризационно-оптическим методом.

Список публикаций:

- [1] Короткова М.А., Куценко С.А. Материалы двадцать пятой всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-25, Крым). [Электронный ресурс] // Исследование растворов аскорбиновой кислоты методом лазерной поляриметрии: сборник тезисов: [сайт]. [2019]. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=3763850> (дата обращения: 01.02.2020).
- [2] Danyaeva J. S., Kutsenko S. A. «The changes in the electronic spectra of ascorbic acid induced by laser radiation». Proc. SPIE. Optical Technologies in Biophysics and Medicine XIX., 2018. Vol. 10716, pp. 1-7.
- [3] Шипунов Б. П., Тимирязев А. В., Кондратова Е. В., Стась И. Е. // Известия Алтайского государственного университета. – 2013. – Т. 1. -№3. С. 189-191.
- [4] Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, ООО «Издательство АСТ», 2003. С.683
- [5] Шнайдем, Л. О. // Производство витаминов. Москва.: Из-во «Пищевая промышленность». 1973. С. 438.

Продольный сдвиг перетяжки пучка Гаусса

Лукияненко Иван Юрьевич

Южно-Уральский государственный университет

Кундикова Наталья Дмитриевна, д.ф.-м.н.

Luk.v5@mail.ru

Эффекты спин-орбитального взаимодействия света проявляются в различных оптически неоднородных средах, а также в сфокусированных лазерных пучках. Данные эффекты взаимодействия малы и ими можно пренебречь в рамках геометрической оптики, но их необходимо учитывать при разработке приборов микро- и нано- оптики. В рамках классической оптики один из эффектов можно за счёт многократного усиления наблюдать визуально при распространении циркулярно поляризованного излучения в многомодовых оптических волокнах. Эффект наблюдается как поворот спекл картины (пятнистой картины) излучения, прошедшего через волокно, при смене знака циркуляции на входе в волокно. Эффект получил название Оптического эффекта Магнуса и на языке классической физики интерпретируется как результат влияния поляризации света на его траекторию [1].

В рамках геометрической оптики можно считать, что свет фокусируется в точку. Любой световой пучок в фокусе линзы образует узкую протяжённую область, называемую перетяжкой. Самый распространённый световой пучок – пучок Гаусса, профиль интенсивности которого описывается функцией Гаусса. В сфокусированных пучках Гаусса возможны продольный и поперечный сдвиг перетяжки. Поперечный сдвиг перетяжки наблюдается в ассиметричном сфокусированном пучке Гаусса [2]. Теоретически было показано, что продольный сдвиг перетяжки может наблюдаться при диафрагмировании пучка Гаусса [3].

Цель данной работы – определить экспериментальные условия, при которых можно обнаружить продольный сдвиг перетяжки пучка Гаусса.